マルチスケール変分法による保存系力学方程式へのアプローチ

総合情報基盤センター　准教授　奥村 弘

近年，Navier-Stokes 方程式に対してマルチスケール変分法が発展してきた．マルチスケール変分法の特徴として，非構造格子（例えば三角形メッシュ）で解像できないスケールの物理現象を近似問題として取り扱うことができるとされている．本報では，波動問題の保存系力学方程式（浅水波方程式）に対するマルチスケール変分法の定式化について概略を報告する．

キーワード：マルチスケール変分法，有限要素法，波動問題，保存系力学方程式，浅水波方程式

１．はじめに

著者は固体内を伝播する波動問題に興味がある．というのも，現在助成されている科研費の研究課題がバラスト粒状体や弾性体など固体の振動問題を扱っているからである．著者はこれまでの研究において，マルチスケール法[1, 2, 3, 4, 5]の観点から有限要素法に基づく波動問題，特に移流方程式に対する数値解析手法を提案し，基礎検証を通じてその高い精度と安定性を示してきた[6, 7]．ただし，非保存系の流体力学方程式（移流方程式）に対して，である．ここで，固体なのになぜ流体なんだよ，と訝る読者もいるかと思われるが，計算屋にとっては，固体力学の問題も，流体力学方程式の初期値・境界値問題と似たり寄ったりである――このことは著者の個人的見解であり，著者のような座りっぱなしのプログラミング好きコンパイル好きデバッグ好き可視化好きの computational potato によって（このポテト表現は Thomas .J.R. Hughes 先生が 1998 年にブエノスアイレスで開催された国際会議 WCCM IV; the 4th world congress on computational mechanics の基調講演で聴衆を賑わせたジョークである．しかしながら，ジョークにはアイロニーがふんだんに含まれているものであることをその時分の著者にはわからなかった），不運にも，こんな potato と袂を分かつ熱心な計算科学・計算工学の研究者らが，マッシュドポテトの滑らかさにまで玉石混交とされ「計算屋は対象とする物理現象を知らない」などと近似解の由緒を軽んじる先生方から揶揄されていた時代もあった――．さて，このことから，流体力学方程式の近似解を求めるスキームおよびアルゴリズムが，弾性体に代表される固体力学の数値解析にも広く通じるところがあるのである．昨年度の終わりごろだったと記憶しているが，著者は Takano らの研究[8, 9]に興味を抱きはじめた．Takano らによれば，実のところ，固体内の衝撃波を表現するには，保存系の流体力学方程式を数値解析的にちゃんと解かなければならない．青野らの論文[9]から引用すれば，「衝撃波が弾性体に衝突すると物体表面で衝撃波が反射し，物体表面での急激な圧力上昇により，表面から弾性体内部に応力波が形成される」そうだ．ここでの「そうだ」は，引用元の文献[9]で扱われている物理現象を著者自らの目で観察していないためであり，決して彼らの研究成果に科学的エビデンスがないということではない．というのも，彼らの研究成果[8, 9]がなければ著者の研究が進まないからである．さて，話を元にもどすが，彼らも，固体（弾性）力学方程式と，流体力学方程式を，保存系の力学方程式として一般化[8, 9]している．一般化できれば，ようやく計算屋の出番である．計算屋は汎用ソルバーを夢見るのである．

２．保存系の力学方程式

有界なd次元$(d=2)$空間領域を $\Omega\subset\mathbb{R}^d$ とし，時間領域 $(0,T)$ における以下の保存系方程式を考える．

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}+\frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i}=0 \quad \text{in}\ \Omega\times(0,\mathrm{T}) \qquad (1)$$

ここで，式(1)は一般的に Euler 方程式と呼ばれ，微分方程式の類型は双曲型に分類される．式(1)における $\mathbf{U}$ は保存変数ベクトル，$\mathbf{F}_i = \mathbf{F}_i(\mathbf{U})$は非粘性の流束（フラックス）ベクトルである($i = 1, \cdots, d$)．なお，式(1)の求解には境界条件と初期条件が与えられる．

注釈 1. 本研究では，式(1)の左辺第 2 項にある流束ベクトルのヤコビアン$\mathbf{A}_i$

$$\frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathbf{F}_i}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i} = \mathbf{A}_i \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i}$$

はとらない（流れの分野では $\mathbf{A}_i \partial \mathbf{U} / \partial x_i$を移流項と呼ばれている）．つまり，非保存系の方程式には変換せず，保存系方程式のまま弱形式をとる．というのも，有限要素法に基づく流体解析を例に挙げれば，保存系方程式のままでは，SUPG (streamline-upwind / Petrov-Galerkin)法[10, 11]に代表される安定化法を適用することがむずかしくなる．Galerkin 有限要素法では，中心差分法と共通の問題，つまり Péclet 数の上昇にともなう数値不安定性（数値振動）の問題を回避させるために, なにかしらの安定化を図る試みが必要である．ところが，保存系の流体力学方程式のまま SUPG 法による定式化をすすめると，移流項を用いることで，上流（風上）側の流線方向にのみ安定化を作用させるテンソル項

$$\int \tau \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x_k} \mathbf{A}_k \cdot \mathbf{A}_i \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_i} \right) \mathrm{d}\Omega$$

が弱形式において陽に出てこない（ここでは重み関数を$\mathbf{W}$としている）．そこが安定化パラメータτに依存する SUPG 法つまりは有限要素法の極みであり限界――有限要素法に基づく数値解析手法で多くにみられることだが，風上法も含め安定化法を適用するために，保存系の方程式をいちいち非保存系のそれに変換しなければならない．しかも，解析対象とする力学現象が同じはずでも保存系の力学方程式と非保存系のそれから得られる数値解の挙動が異なることがある．これが現在の流れの数値計算では，有限要素法ではなく，有限体積法や差分法に基づくアプローチが主流となっていった理由――であった, と著者は思う. ただし，本報では所謂P_1有限要素近似の範疇を語るのであって，マルチスケール変分法と密接な関係のある気泡関数要素 [1, 12, 13]， residual-free bubble[1, 14]の議論はややこしくなるので割愛する．

本報では，保存系方程式に対するマルチスケール有限要素法について概略ながら解説し，その可能性を謳う．

注釈 2. 「マルチスケール」という用語を唐突に使ってしまったが，これには安定化法と密接な関係がある．流れ問題に対するアプローチにはマルチスケール変分法[1, 2, 3, 4, 5]というパラダイムシフトが起こりつつあった．マルチスケール変分法は，有限要素つまりメッシュの分割で解像できないスケールの解もひっくるめて表現しようとする意気込みであった．ここに，あった，あった，と二度「あった」を使ったが，近年ではマルチスケール変分法どころか流れの有限要素法の研究は進捗していないとみえる．マルチスケール変分法の近似には，アイソジオメトリック解析[15]だの NURBS[15]だの，横文字だらけで複雑で面倒で難しくて，有限要素法の黎明期からがんばってきた研究者共々にとっては意気消沈した，のではないかと著者が勝手に危惧している. なにはともあれ，流れの有限要素法研究の隆盛は過ぎ去ったのであろう．けれども，著者の本懐としては，保存系方程式に対しても有効な有限要素法を開発したい，という願望が去来していた．なので，願望のままずっとむずむずしていても進歩がないので，これまでに培ってきたマルチスケール法の考え方をめぐらせて，保存系方程式を安定かつ高精度に解く有限要素法を開発しよう，と不退転の決意に至った．以上では，著者の想い強くして，言葉が少し冗長になってしまった．

注釈 3. Euler 方程式(1)における保存変数ベクトル $\mathbf{U}$ の中身に依って，式(1)に対する力学方程式の名称が異なる. 例えば, このベクトル成分に，流体の密度，運動量，全エネルギーを選べば，式(1)は圧縮性流れの保存系表現となる．また，固体（弾性体）密度と変形速度の積，空間成分ごとの応力を選べば，弾性動力学方程式となる．本研究では, 他の研究との差異をつけるため, 波動を「波」，圧縮性流れ等にみられる衝撃波を「段波」とみなし，浅水波方程式の保存変数ベクトルを選ぶ．と

いうのも，計算精度と数値安定性の検証に用いる材料（厳密解）が浅水波のものしか手元になかったからである．それにしても，著者のような計算屋にとっては，非粘性流束ベクトルを伴った保存系方程式であれば，圧縮性流体力学方程式だろうと，弾性動力学方程式だろうと，適用する数値解析手法の検証には，どれを選んでも「相似則」がみられるものと高を括っている．ただし，諸々の物理現象の本質については触れない．

３．波の方程式に対するマルチスケール変分法

二次元($d=2$)の浅水波方程式には次の保存変数ベクトル $\mathbf{U}$ を選ぶ．

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix}U_1\\U_2\\U_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h\\hu_1\\hu_2\end{bmatrix} \tag{3}$$

ここで，h は水深，u_1と u_2はそれぞれ $x_1=x$軸方向と $x_2=y$軸方向の流速（velocity）である．そして，x軸および y軸方向の流束フラックス$\mathbf{F}_1$と$\mathbf{F}_2$はそれぞれ以下のとおりである．

$$\mathbf{F}_1=\begin{bmatrix}U_2\\ \dfrac{U_2^2}{h}+\dfrac{gh^2}{2}\\ \dfrac{U_2U_3}{h}\end{bmatrix},\quad \mathbf{F}_2=\begin{bmatrix}U_3\\ \dfrac{U_2U_3}{h}\\ \dfrac{U_3^2}{h}+\dfrac{gh^2}{2}\end{bmatrix} \tag{4}$$

ここで，g は重力加速度である．本報では，議論をシンプルにしたいので鉛直方向 z軸の海底勾配（ソース項）は考えない．なお，式(1)は下添え記号 i を展開し，次式のように書き換えても差し支えない．

$$\frac{\partial\mathbf{U}}{\partial t}+\frac{\partial\mathbf{F}_1}{\partial x}+\frac{\partial\mathbf{F}_2}{\partial y}=0\quad\text{in }\Omega\times(0,\mathrm{T}) \tag{5}$$

保存系方程式(1)あるいは(5)に対する時間積分法として，1 次精度（一段階）陽的 Euler 法を適用して議論を進める．高次（多段階）陽解法でも，陰解法でも，当然ながら適用可能だが，本報で議論するマルチスケール変分法にのみフォーカスするため，もっともシンプルな陽解法にて話をすすめる．このとき，時間増分量を $\Delta t>0$，時間ステップを n とすると次式のように表せられる．

$$\mathbf{U}^{n+1}=\mathbf{U}^{n}-\Delta t\frac{\partial\mathbf{F}_i(\mathbf{U})}{\partial x_i}\ \text{for } n=0,1,\cdots,\left[\frac{T}{\Delta t}\right] \tag{6}$$

二次元空間領域 Ω を三角形要素Kによる正則な有限要素分割 $\mathcal{T}_h$を与え，三角形 1 次要素の有限要素空間 V_h，区分連続な部分実数空間 $\mathbb{R}_0$を考える．ここで，$h=\max\big(\mathrm{diam}(K)\big),\forall K\in\mathcal{T}_h$ はメッシュパラメータである．

このとき，式(6)に対するマルチスケール変分法の定式化では，$\mathbf{U}_h^{n+1}\in(V_h)^3,\mathbb{G}_h\in(\mathbb{R}_0)^3$ を見出すカップリングされた次の近似問題として与える．

$$\begin{cases}(\mathbf{W}_h,\mathbf{U}_h^{n+1})=(\mathbf{W}_h,\mathbf{U}_h^{n})+(\epsilon_{\mathrm{add}}\mathbf{W}_h,\mathbb{G}_h-\mathbf{U}_h)\\ \qquad -\Delta t\left(\mathbf{W}_h,\dfrac{\partial\mathbf{F}_i(\mathbf{U}_h^n)}{\partial x_i}\right)\quad\forall\mathbf{W}_h\in(V_h)^3\\ (\mathbb{G}_h-\mathbf{U}_h,\mathbf{L}_h)=0\qquad\forall\mathbf{L}_h\in(\mathbb{R}_0)^3\end{cases} \tag{7}$$

ここで，ϵ_{add}をマルチスケール関数と呼称する．また，$\mathbb{G}_h=\mathbb{P}_h\mathbf{U}_h$であり，$\mathbb{P}_h$は$V_h$から$\mathbb{R}_0$への$L^2$直交射影子である．そして，$(\cdot,\cdot)$ は Ω でのL^2内積である．マルチスケール関数の詳細については，拙著の文献[6, 7]にゆずる．

４．おわりに

本報では，波動問題を保存系方程式のひとつである浅水波方程式から見つめ直し，マルチスケール変分法によるアプローチを示した．ただ，やや尻切れ蜻蛉ぎみの原稿になってしまったことが個人的に悔やまれる．でも，業界人ならご理解とご共感をいただけると思う．というのも，今後著者が査読付き論文の投稿を予定している場合，これから執筆する研究成果を出し惜しみせざる得ないためである．本報の続編となる査読論文が公開された暁には，著者の手の内をすべて明かし，賢明な読者のお役に少しでも立てるよう努力していきたい．薄っぺらの本報でも賢明な読者のお役に立てればもっけの幸いである．

謝辞

本研究内容は JSPS 科研費 JP16K13734 の助成を受けた研究成果である．

参考文献

[1] T. J. R. Hughes, G. R. Feijóo, L. Mazzei and J. B. Quincy: The variational multiscale method - a paradigm for computational mechanics, Vol.166, pp.3-24, 1998.

[2] V. John, S. Kaya and W. Layton: A two-level variational multiscale method for convection-dominated convection-diffusion equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.195, pp.4594-4603, 2006.

[3] L. Song, Y. Hou and H. Zheng: A variational multiscale method based on bubble functions for convection-dominated convection - diffusion equations, Applied Mathematics and Computation, Vol.217, pp.2226-2237, 2010.

[4] R. Codina: On stabilized finite element methods for linear systems of convection-diffusion-reaction equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.188, pp.61-82, 2000.

[5] R. Codina: Stabilization of incompressibility and convection through orthogonal sub-scales in finite element methods, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.190, pp.1579-1599, 2000.

[6] H. Okumura: Variational Multiscale Finite Element Method Based on Bubble Element for Steady Advection-Diffusion Equations, Memoirs of the Faculty of Human Development; University of Toyama, Vol.13 (2), pp.297-304, 2019.

[7] マルチスケール変分法と気泡関数要素の関係性について，富山大学総合情報基盤センター広報，Vol. 2019.

[8] 高野，後藤，西野：弾性動力学方程式に対する有限体積法（第 1 報，計算原理），日本機械学会論文集(A 編)，64 巻 626 号(1998-10)，論文 No. 97-0818, 1998.

[9] 青野，湯澤，後藤，高野：衝撃波による固体内応力波伝播の数値計算，第 14 回数値流体力学シンポジウム，C09-4, JSCFD, 2000.

[10] L. P. Franca and T. J. R. Hughes: Convergence analysis of Galerkin least-squares methods for advective-diffusive forms of the Stokes and incompressible Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.105, pp.285-298, 1993.

[11] A. N. Brooks and T. J. R. Hughes: Streamline Upwind/Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with Navier-Stokes equations, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.32, pp.199-259, 1994.

[12] J. C. Simo, F. Armero and C. Taylor: Galerkin finite element methods with bubble for advection dominated incompressible Navier-Stokes, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol.38, pp. 1475-1509, 1995.

[13] T. Yamada: A bubble element for the compressible Euler equations, IJCFD, Vol.9, pp.273-283, 1998.

[14] F. Brezzi, L. P. Franca, T J. R. Hughes and A. Russo: $b = \int g$, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering , Vol.145, 329-339, 1997.

[15] J. A. Cottrell, T. J. R Hughes, Y. Bazilevs: Isogeometric Analysis: Toward Integration of CAD and FEA, Wiley, 2009.